УДК 621.31:535.215

Фоточувствительные структуры на основе наногетероструктур Si/Ge для оптических систем передачи информации

А.В. Войцеховский, А.П. Коханенко, К.А. Лозовой, А.М. Турапин, И.С. Романов

В работе анализируются возможности создания фоточувствительных структур на основе наногетероструктур Si/Ge для оптических систем передачи информации. Проведен расчет параметров самоформирующихся островков германия на кремнии в зависимости от условий роста методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

PACS: 85.60.Gz; 68.65.Hb; 81.10.Aj.

Ключевые слова: инфракрасные фотодетекторы, наногетероструктуры, квантовые точки, волоконно-оптические линии связи.

Введение

В последние несколько лет наметились перспективы использования в оптоэлектронике полупроводниковых материалов на основе германия в кремнии, содержащих кластеры Ge нанометровых размеров (квантовые точки), "встроенные" в матрицу Si. Созданы светоизлучающие и фотоприемные кремний-германиевые устройства, позволяющие кремниевой технологии успешно конкурировать с традиционными оптоэлектронными материалами, например, такими как соединения A^{III}B^V.

Повышение эффективности устройств на основе наногетероструктур Si с квантовыми точками (KT) Ge достигается при проявлении эффектов пространственного квантования, когда геометрические размеры наноструктур составляют менее 100 нм, и реализуется максимально высокая плотность массивов KT [1, 2].

В настоящее время наиболее перспективный метод формирования квантовых точек основан на эффектах самоорганизации полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных системах. Эпитаксия происходит в неравновесных условиях, и формирующаяся структура определяется кинетикой стадий роста и самоорганизации. Упругие деформации

Войцеховский Александр Васильевич, зав. кафедрой. Коханенко Андрей Павлович, профессор. Лозовой Кирилл Александрович, студент. Турапин Алексей Михайлович, аспирант. Романов Иван Сергеевич, студент. Томский государственный университет. Россия, 634050, Томск, пр. Ленина, 36. Тел.: (3822) 413-517. E-mail: vav@elefot.tsu.ru

Статья поступила в редакцию 20 марта 2013 г.

© Войцеховский А.В., Коханенко А.П., Лозовой К.П., Турапин А.М., Романов И.С., 2013

в эпитаксиальной пленке и в островках на ее поверхности являются ключевым фактором как в морфологическом переходе от плоской пленки к островковой (механизм Странского – Крастанова), так и в последующих изменениях размеров, формы и пространственного распределения островков. В последовательности происходящих в таких системах кинетических переходов важной является стадия формирования однородных по размеру, когерентных (не содержащих дефектов) трёхмерных островков. Эффекты самоорганизации (упорядочения) заключаются в появлении в системе островков с предпочтительными значениями их параметров: размеров, формы, расстояний между нанокластерами и их взаимного расположения. Происходящие процессы упорядочения связаны с минимизацией суммарной свободной энергии системы. Распределению островков по размерам уделяется особое внимание, так как этот параметр чрезвычайно важен в системах, содержащих массив квантовых точек как искусственных атомов одного сорта.

В связи с этим целью настоящей работы являлся анализ возможности создания фоточувствительных структур различных конструкций на основе наногетероструктур Si/Ge для оптических систем передачи информации, а также расчет параметров самоформирующихся островков германия на кремнии в зависимости от условий роста методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Управление параметрами массивов квантовых точек Ge на Si для создания фоточувствительных структур на их основе

Одним из важнейших направлений развития единой системы связи (обработки и передачи информации) является разработка оптоволоконных линий передачи и фотонных приборов, работающих в окне прозрачности кварца вблизи длин волн 1,3 и 1,55 мкм. Представляется необходимым создание на одном чипе всего набора компонентов волоконно-оптических линий связи (ВОЛС), в т.ч. светоизлучающих устройств и фотоприемников. Для уменьшения стоимости таких систем необходимо, чтобы большее число компонент было выполнено на основе типовых методов кремниевой технологии.

В данной работе был проведен анализ возможности создания фотоприемников ИКдиапазона на основе наногетероструктур с КТ в виде Ge в Si. В работах [3–6] были получены и исследованы фотодетекторы (ФД) для применения в ВОЛС. При длине волны $\lambda = 1,3$ мкм достигнута квантовая эффективность на уровне 1–4,2 %. Плотности темнового тока при смещении 1 В и комнатной температуре составляли 10⁻⁴–10⁻³ A/см², что существенно превышает токи как в кремниевых, так и в германиевых диодах.

В работе [7] авторы сообщают о создании Ge/Si ФД, содержащих в качестве активного элемента от 12 до 36 слоев КТ, выращенных с помощью метода молекулярно-лучевой эпитаксии на окисленной поверхности кремния при различных температурах. Увеличение квантовой эффективности было достигнуто за счет реализации волноводной структуры фотоприемника и использования эффекта полного внутреннего отражения света от стенок волновода. Фоточувствительные слои были сформированы на подложках кремний-на-изоляторе в виде латеральных волноводов шириной 50 мкм. Длина волноводов варьировалась от 100 мкм до 5 мм. Оказалось, что максимальная квантовая эффективность реализуется в структурах с длиной менее 3 мм при величине обратного смещения более 3 В и достигает значений 21 и 16% для длин волн 1,3 и 1,55 мкм, соответственно. Столь высокие значения квантовой эффективности получены за счет высокой плотности КТ Ge в активной области фотодетектора и эффекта многократного внутреннего отражения.

Задача детектирования оптического излучения тонкими микро- и нанополупроводниковыми слоями имеет большой практический интерес. Однако применение таких слоёв ограничено их низкой поглощающей способностью [8].

Предложены конструкции с использованием многослойных брэгговских отражателей на основе материальной системы Si/Ge для создания оптического резонатора на длинах волн $\lambda = 1,3$ мкм и $\lambda = 1,55$ мкм для повышения поглощенной оптической мощности [9].

Таким образом, ставится задача получения массивов КТ с высокой поверхностной плотностью и заданными размерами, обеспечивающими работу в выбранном диапазоне длин волн.

Одним из методов получения гетероструктур Si:Ge является МЛЭ, к основным достоинствам которой можно отнести:

 получение и сохранение атомно-чистой поверхности кристалла, используемого в качестве подложки;

 проведение эпитаксиального роста при низкой температуре подложки и малых скоростях, что существенно увеличивает резкость границ гетеропереходов;

 контроль эпитаксиальных процессов на подложке поверхностно-чувствительными методиками и методами масс-спектроскопии непосредственно в ходе роста;

- полная автоматизация процессов роста.

Существуют разработанные режимы роста структур для получения достаточно однородных по размеру островков нанометрового масштаба, которые обеспечивают возможность функционирования приборов на структурах с КТ при комнатной температуре, а также реализацию приборных характеристик, нечувствительных к изменению температуры в широких пределах.

В работе проводился расчёт зависимости параметров самоорганизующегося массива КТ Ge на поверхности Si(100) от условий роста. Поскольку в процессе роста островки образуются самопроизвольно, то управлять их морфологией можно только изменяя условия синтеза, т.е. температуру подложки, скорость напыления, количество напылённого материала. Кроме того, заметно отличаются по своим характеристикам массивы германиевых кластеров, выращенных на поверхностях с различной кристаллографической ориентацией, а также на предварительно окисленной поверхности кремния. К дополнительным способам управления параметрами системы можно также отнести использование сурфактантов и литографии, а также радиационное воздействие на структуру.

Из анализа литературных данных по проблеме роста квантовых точек германия на кремнии методом МЛЭ был сделан вывод о том, что наиболее подходящей для описания различных стадий ростового процесса является кинетическая модель, предложенная в работе [10]. При известных параметрах гетероэпитаксиальной системы, которые частично могут выбираться из сопоставления с экспериментом, эта модель позволяет рассчитывать функцию распределения КТ по размерам и поверхностную плотность КТ. Она также позволяет объяснить наблюдаемые в эксперименте зависимости среднего латерального размера и плотности КТ от температуры роста, скорости осаждения и толщины осаждения.

В ходе работы была изучена динамика процессов на начальных стадиях роста КТ, составлена программа для расчета характеристик ансамбля КТ, проведено компьютерное моделирование и вычислительные эксперименты по определению зависимости параметров гетероэпитаксиальной системы от условий роста. При этом была учтена температурная зависимость коэффициента диффузии Ge на поверхности Si и наличие двух выделенных форм островков на начальной стадии роста КТ, а именно, островков пирамидальной формы с квадратным или прямоугольным основанием (т.н. пирамидальных и клиновидных *hut*-кластеров).

Расчет кинетики

Для расчета кинетики формирования клиновидных (*ed*Ge-) кластеров, как и в случае пирамидальных (*hut-*) кластеров, необходимо, прежде всего, определить свободную энергию образования островка как функцию его размера.

Будем считать, что отношение длины основания edGe-кластеров к ширине основания L распределено случайным образом и достаточно равномерно в интервале от немногим более единицы до десяти. Тогда связь между числом атомов в островке i и его латеральным размером (шириной) L определяется выражением

$$i = \left(\frac{L}{\alpha l_0}\right)^3$$

с геометрическим фактором

$$\alpha = \left(\frac{6d_0 ctg\phi}{7l_0}\right)$$

где l_0 – среднее расстояние между атомами на поверхности, d_0 – высота монослоя (МС), φ – контактный угол с поверхностью подложки.

При росте по механизму Странского–Крастанова за счет диффузии атомов из смачивающего слоя, стимулированной упругими напряжениями, в случае пирамидальных островков с прямоугольным основанием и постоянным углом при основании ф свободная энергия (выраженная в единицах $k_{\rm B}T$, T – температура подложки, $k_{\rm B}$ – постоянная Больцмана) имеет вид, аналогичный виду для пирамидальных кластеров с квадратным основанием, а именно:

$$A = \frac{5[\gamma(\phi)/\cos\phi - \gamma(0)]\alpha l_0^2}{k_B T},$$
$$B = \frac{[1 - Z(\phi)]\lambda \varepsilon_0^2 l_0^2 d_0}{k_B T} \ln\left\{\frac{\Psi_0}{d_0 [1 - Z(\phi)]\lambda \varepsilon_0^2}\right\}$$

где где $\gamma(0)$ и $\gamma(\phi)$ – удельные поверхностные энергии основания и боковых граней пирамиды, $Z(\phi)$ – коэффициент релаксации упругой энергии в островке, λ – модуль упругости материала, ε_0 – рассогласование решеток, Ψ_0 – плотность смачивающей энергии на поверхности подложки, k_0 – коэффициент релаксации силы притяжения атомов к подложке; ζ – перенапряжение смачивающего слоя.

На рис. 1 приведены зависимости свободной энергии образования *ed*Ge-кластера в системе Ge/Si(100) при температуре $T = 470^{\circ}$ C от числа частиц і и толщины смачивающего слоя h. Ha puc. 2 дается сравнение свободной энергии образования островков для edGe- и hut-кластеров. Как видно из этих графиков, в области изменения толщины осажденного материала h = 5,5-6,5 MC активационный барьер нуклеации составляет 10-25 единиц для *ed*Geкластеров и 5–10 единиц для *hut*-кластеров, а критическое количество атомов в островке составляет 40-100 и 25-50 атомов, соответственно. Эти значения соответствуют критическому латеральному размеру зародыша 1,3–1,7 нм для edGe-кластеров и 2,1–2,6 нм для hut-кластеров.

Скорость зарождения островков определяется формулой Зельдовича [10]:

$$I = \frac{W^{+}(i_{c})}{l_{0}^{2}} \left(\frac{\Delta F^{*}(i_{c})}{2p}\right)^{1/2} e^{-\Delta F(i_{c})},$$

где $W^{+}(i_{c})$ – скорость поступления атомов к островку критического размера, а i_{c} – критиче-



Рис. 1. Свободная энергия образования hutкластеров в системе Ge/Si(100) при различных значениях толщины смачивающего слоя Ge h, MC

$$\Delta F(i) = Ai^{2/3} - B\zeta i$$



Рис. 2. Свободная энергия образования hut- и edgeкластеров в системе Ge/Si(100) при двух различных значениях толщины смачивающего слоя Ge h, MC

ский размер, при котором свободная энергия имеет максимум:

$$i_c = \left(\frac{2A}{3B\zeta}\right)^3$$

Для нахождения $W^+(i_c)$ для островков пирамидальной формы с прямоугольным основанием воспользуемся моделью, использованной в [10], но учтем изменение периметра их основания:

$$\frac{di}{dt} = \frac{12D}{l_0^2} \frac{\alpha B \zeta}{v} i^{1/3}$$

где D – коэффициент диффузии атомов из смачивающего слоя в островки, вызванной полем упругих напряжений вокруг границы островка длины 12*L*. Для смачивающего слоя равновесной толщины di/dt = 0, что позволяет найти $W^+(i)$:

$$W^{+}(i) = \frac{12D}{l_0^2} \frac{\alpha B(\zeta + 1)}{\nu} i^{1/3}.$$

Для скорости зарождения островков удлиненной формы в зависимости от перенапряжения смачивающего слоя получаем следующую формулу:

$$I(\zeta) = \frac{a}{\tau l_0^2} \zeta(\zeta + 1) e^{-\Delta F(i_c)},$$

где $a = \frac{3B}{4(\pi A)^{1/2}}, \tau = \frac{3l_0^2 v}{24\alpha BD}, v - параметр обре-$

зания поля упругих напряжений [10].

Из сравнения скоростей зарождения для островков пирамидальной формы с квадратным и прямоугольным основанием (рис. 3) видно, что островки удлиненной формы образуются несколько позже и их зарождение происходит более интенсивно, что, по нашему мнению, может объяснить наблюдаемое в эксперименте увеличение доли клиновидных кластеров в массивах квантовых точек на более поздних стадиях роста.



Рис. 3. Зависимость скорости зарождения пирамидальных и клиновидных островков в системе Ge/ Si(100) от времени

Весь дальнейший расчет кинетики формирования клиновидных кластеров ведется аналогично пирамидальным [10], но с пересчитанными параметрами, которые были перечислены выше.

Результаты расчетов показывают, что поверхностная плотность островков N обоих видов монотонно уменьшается с уменьшением скорости осаждения германия V или с ростом температуры напыления T. Средний размер островков, напротив, увеличивается с ростом температуры T или уменьшением скорости роста V. Это объясняется тем, что понижение температуры роста, так же как и увеличение потока Ge, ведет к уменьшению диффузионной длины адатомов на подложке. Соответственно, область сбора адатомов для одного островка уменьшается, уменьшаются и его размеры, а поверхностная плотность возрастает.

При этом может быть выведено общее правило, что для одних и тех же параметров роста средние размеры клиновидных островков меньше (см. рис. 4, на котором изображены функции распределения *ed*Ge- и *hut*-кластеров), а поверхностная плотность больше, чем для пирамидальных кластеров, что делает их более привлекательными для приборных применений.

Эксперимент

На базе проведённых оценок экспериментально определялись условия синтеза для получения массива КТ Ge с заданными параметрами. Синтез структур проводился на установке МЛЭ «КАТУНЬ-100». В результате проведения ростовых экспериментов достигнута плотность островков Ge более 1011 см⁻².

Исследование поверхности полученных образцов осуществлялось с помощью атомно-си-



Рис. 4. Функция распределения edge- и hutкластеров Ge на поверхности Si(100) в один и тот же момент времени

лового микроскопа (ACM) NT-MDT SOLVER. Получены ACM-изображения образцов, выращенных при различных температурах и скоростях осаждения. На рис. 5 представлено ACM-изображение образца, полученного при температуре T = 350 °C и скорости осаждения V = 0.45 MC/c (монослоев в секунду). Толщина напыленного Ge составила 6 MC. Средний размер германиевых квантовых точек для этого образца равен 30 нм. Полученные результаты синтеза хорошо согласуются с используемым методом расчета параметров самоорганизующихся KT Ge.

Заключение

По результатам проведенного рассмотрения можно сделать вывод, что для реализации преимуществ ФД с КТ для систем большей размерности необходимо уменьшать размеры квантовых точек до величин менее 10 нм и одновременно увеличивать слоевую плотность КТ с тем, чтобы добиться минимальных значений темнового тока без потери квантовой эффективности фотопреобразования. Если сравнить разные типы фотодетекторов (фотодиоды, фототранзисторы и волноводные фотодиоды), то наибольшая квантовая эффективность достигается в волноводных исполнениях и фотодетекторах с многослойными брэгговскими отражателями за счет более полного поглощения падающего излучения.

Для различных применений необходимо создавать гетероструктуры с КТ с различными свойствами, которые задаются такими параметрами КТ, как их форма и латеральный размер, определяющими энергетический спектр электронов. Поэтому важной задачей является рас-



Рис. 5. ACM-изображение островков Ge на поверхности Si(100), выращенных при температуре подложки 350 оС и скорости осаждения Ge 0,64 A/c

чет оптимальных условий роста для создания тех или иных гетероструктур. Зная морфологию нанокластеров, т.е. функцию плотности их распределения по размерам и поверхностную плотность островков, можно рассчитать энергетический спектр электрона, его волновые функции в квантовой точке, а также коэффициент поглощения материала. Возможно решение обратной задачи: для создания структур, обладающих максимумом поглощения в областях 1,3 и 1,55 мкм, рассчитывается необходимый для этого средний размер квантовых точек и определяются оптимальные для получения подобных структур условия роста методом МЛЭ.

Литература

1. Пчеляков О.П., Двуреченский А.В., Никифоров А.И., Войцеховский А.В., Григорьев Д.В., Коханенко А.П. // Изв. вузов. Физика. 2010. № 9. С. 59

2. Kang L. Wang, Cha D, Liu J, Chen C. // Proc. of the IEEE. 2007. V. 95. No. 9. P. 1866

3. *Elcurdi M., Boucaud P., Sauva*Ge S. // Appl. Phys. Lett. 2002. V. 80. No. 3. P. 509

4. Tong S., Liu J.L., Wan J, Kang L. Wang // Appl. Phys. Lett. 2002. V. 80. No. 7. P. 1189

5. *MaSini G., Colace L, Assanto G. //* Appl. Phys. Lett. 2003. V. 82. No. 15. P. 2524

6. Elving A., Hansson G.V., Ni W.-X. // PhySica E. 2003. V. 16. P. 528

7. Якимов А.И., Двуреченский А.В., Кириенко В.В., Никифоров А.И. // ФТТ. 2005. Т. 47. № 1. С. 37

8. Yu J., Kasper E., Oehme M. // Thin Solid Films. 2006. V. 508. P. 396

9. Войцеховский А.В., Каширский Д.Е., Скрыльников А.А. // Изв. вузов. Физика. 2010. № 9/3. С. 151

10. Дубровский В.Г. // ФТП. 2006. Т. 40. № 10. С. 1153

Photosensitive structures based on *Si/Ge* nanoheterostructures for optical communication systems

A.V. Voytsekhovskiy, A.P. Kokhanenko, K.A. Lozovoy, A.M. Turapin, and I.S. Romanov

Tomsk State University 36 Lenin av., Tomsk, 634050, Russia E-mail: vav@elefot.tsu.ru

In this work, the opportunities for Si/Ge nanoheterostructures-based photosensitive structures for optical communication systems are analyzed. Estimation of Ge on Si self-organized islands parameters dependences on growth condition in the method of molecular beam epitaxy is carried out.

PACS: 85.60.Gz; 68.65.Hb; 81.10.Aj *Keywords:* infra-red photodetectors, nanoheterostructures, quantum dots, fiber-optic communication lines.

Bibliography – 10 references

Received March 20, 2013